Gromacs 软件使用指南

（upgrade to gromacs-4.0.7）

2010 年 5 月

中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心

目录

_______________软件使用指南..1
目录..2
1. 软件介绍...3
2. 软件的安装与测试...3
2.1 安装目录及安装信息...3
2.2 测试结果..3
3. 软件的运行使用方法..3

1. 软件介绍

GROMACS 是分子动力学通用软件包，用于模拟含几百到几百万粒子体系的牛顿运动方程。它特别适用于生物分子，如蛋白质，油脂等有大量复杂键作用的体系，但是由于 GROMACS 在计算非键作用（这占了模拟的主要部分）时相当快，因此也可广泛应用于非生物体系，如聚合物。GROMACS 使用标准 MPI 通信进行并行计算。

3.3.3 版

2. 软件的安装与测试

2.1 安装目录及安装信息

安装目录：/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-3.3.3

2.2 测试结果

m(n,n)：表示在两个结点上各用 n 个 cpu，共 m 个进程

测试 1：share/gromacs/tutor/mixed

CPU 数	wallclock	CPU 加速比
1	1394s	
2	899s	
4	513s	
8	343s	
8(4,4)	367s	
8(2,2,2,2)	371s	
16(8,8)	914s	
24(4,4,4,4,4,4)	1312s	

3. 软件的运行使用方法

以测试所用数据为例：

1。进入 share/gromacs/tutor/water

2。../../../../bin/grompp_d -np NPROCS（制作用 NPROCS 个进程来计算的数据）

2 。 mpirun –machinefile HOSTFILE –np NPROCS /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-3.3.3/bin/mdrun_d -s topol -v -N 30

4. 作业提交

登录到 LB 结点之后，在$HOME/.bashrc 文件里面加入下面内容：
export PATH=$PATH: /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-3.3.3/bin/
export GMXLIB=/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-3.3.3/share/gromacs/top/

进入到数据所在目录，用 bsub 提交作业：
bsub -W MIN -n NPROCS -a intelmpi -q QUEUE -e %J.err -o %J.out mpirun.lsf "mdrun_d -s INPUT -v -N 30"

MIN：为作业估计的运行时间（分钟）
NPROCS：作业进程数
QUEUE：目标队列

“-s INPUT -v -N 30”：和具体要进行的计算有关，需要用户自己指定

4.0.4 版

软件的安装与测试

2.1 安装目录及安装信息

安装目录：/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.4

2.2 测试结果

m(n,n)：表示在两个结点上各用 n 个 cpu，共 m 个进程

测试 1：share/gromacs/tutor/mixed

CPU 数	wallclock	CPU 加速比	检验测试
1	1369s	1	1382s
2	663s	2.06	
4	351s	3.9	
8	203s	6.74	202s

8(4,4)	204s	6.71	205s
8(2,2,2,2)	208s	6.58	
16(8,8)	143s	9.57	
24(4,4,4,4,4,4)	259s	5.29	
32(8,8,8,8)	109s	12.56	
40(8,8,8,8,8)	116s	11.8	
48(8,8,8,8,8,8)	111s	12.33	

测试 2：share/gromacs/tutor/speptide/

参照 Gromacs 手册，测试了从 pdb 文件到分子动力学模拟的整个操作过程。测试结果：这个过程涉及的模块命令运行正常。

（100ps 蛋白质水环境分子动力学模拟测试结果，修改了 full.mdp 文件中的 nsteps 参数）

CPU 数	wallclock	CPU 加速比
1	505s	1
2	244s	2.07
4	128s	3.95
8	70s	7.21
8(4,4)	70s	7.21
8(2,2,2,2)	72s	7.01

3. 软件的运行使用方法

以测试所用数据为例：

1。进入 share/gromacs/tutor/mixed

2 。 mpirun –machinefile HOSTFILE –np NPROCS /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.4/bin/mdrun_d -s topol -v -N 30

4. 作业提交

登录到 LB 结点之后，在$HOME/.bashrc 文件里面加入下面内容：

export PATH=$PATH: /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.4/bin/

export GMXLIB=/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.4/share/gromacs/top/

进入到数据所在目录，用 bsub 提交作业：

bsub -W MIN -n NPROCS -a intelmpi -q QUEUE -e %J.err -o %J.out mpirun.lsf "mdrun_d -s INPUT -v -N 30"

MIN：为作业估计的运行时间（分钟）

NPROCS：作业进程数

QUEUE：目标队列

“-s INPUT -v -N 30”：和具体要进行的计算有关，需要用户自己指定

4.0.3 版

软件的安装与测试

2.1 安装目录及安装信息

安装目录：/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.3

2.2 测试结果

m(n,n)：表示在两个结点上各用 n 个 cpu，共 m 个进程

测试 1：share/gromacs/tutor/mixed

CPU 数	wallclock	CPU 加速比
1	1157s	1
2	550s	2.1
4	304s	3.8
8	176s	6.6
8(4,4)	178s	6.5
8(2,2,2,2)	183s	6.3

3. 软件的运行使用方法

以测试所用数据为例：

1。进入 share/gromacs/tutor/mixed

2 。 mpirun –machinefile HOSTFILE –np NPROCS /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.3/bin/mdrun -s topol.tpr -v -o md_traj

4. 作业提交

登录到 LB 结点之后，在$HOME/.bashrc 文件里面加入下面内容：

export PATH=$PATH: /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.3/bin/

export
GMXLIB=/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.3/share/gromacs/top/

进入到数据所在目录，用 bsub 提交作业：
bsub -W MIN -n NPROCS -a intelmpi -q QUEUE -e %J.err -o %J.out mpirun.lsf "mdrun -s INPUT -v -o OUTPUT"

MIN：为作业估计的运行时间（分钟）
NPROCS：作业进程数
QUEUE：目标队列

“-s INPUT -v -o OUTPUT”：和具体要进行的计算有关，需要用户自己指定

4.0.7 版

2010.5.13-14

一共安装了gromacs-4.0.7的两个版本：disable-float的（即enable-double，双精度的）：
/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.7
以及enable-float（单精度）的：
/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.7-float

使用：
source
/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.7-float/bin/GMXRC
或
source /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gromacs/gromacs-4.0.7/bin/GMXRC

5. 用户测试结果与问题

测试过程中遇到的环境变量设置问题，已经解决。目前 3 个版本的 Gromacs 运行均正常。

6. 运行建议

（1）Gromacs3.3.3 版及 4.0.4 版均为双精度编译版本，4.0.3 版为单精度版本。从算例测试结果看，单精度版运算速度快约 15%。
（2）从现有规模测试结果来看，节点间的并行效率变差，一般大于 16 个 cpu，并行效率会降低掉 60%以下。
建议根据计算模拟所估计时间的长短来估计相应的并行规模。